3. Übung zur Struktur der Materie WS 2018/19

Ausgabe: 26.10.2018
Abgabe: bis 02.11.2018 12:00 Uhr

Prof. Dr. D. Suter
Dr. J. Weingarten

Aufgabe 1: Bravais-Gitter und Wigner-Seitz-Zelle — 4 Punkte

a) Was ist die Definition eines Bravais-Gitters?

b) Zeichnen Sie in ein 2D innenzentriertes Quadratgitter eine primitive und eine nicht-primitive Einheitszelle. Inwiefern unterscheiden sich diese?

c) Was ist die Wigner-Seitz-Zelle und wie lässt sich diese konstruieren?

d) Konstruieren Sie die Wigner-Seitz-Zelle für das innenzentrierte Rechteckgitter in 2D.

Aufgabe 2: Miller Indizes — 4 Punkte

Netzebenen in einem Kristall lassen sich durch die sogenannten Miller Indizes charakterisieren. Bestimmen Sie die Miller Indizes der Netzebenen mit den Achsenabschnitten

$$\Big(1,1,1\Big) \quad \Big(2,3,1\Big) \quad \Big(\frac{1}{3},1,\frac{2}{3}\Big) \quad \Big(1,2,\infty\Big) \quad \Big(-2,\infty,\infty\Big) \quad . \tag{1}$$

Zeichnen Sie die Netzebenen ebenfalls in ein einfach kubisches Gitter ein.

Aufgabe 3: Bragg-Bedingung — 5 Punkte

Bei der elastischen Streuung von Röntgenstrahlung an einem Kristallgitter lässt sich die Bragg Bedingung aus der äquivalenten Bedingung $\vec{G} = \vec{k}_\mathrm{s} - \vec{k}_\mathrm{i}$ herleiten. Dabei sind $\vec{k}_\mathrm{i}$ und $\vec{k}_\mathrm{s}$ die Wellenzahlvektoren der ein- und auslaufenden Röntgenstrahlung und $\vec{G}$ bezeichnet einen reziproken Gittervektor, welcher senkrecht auf den Netzebenen des Kristalls steht. Der kleinste Abstand zwischen zwei Netzebenen lässt sich schreiben als

$$d = \frac{2\pi}{|\vec{G}_\mathrm{hkl}|} \quad , \tag{2}$$

mit dem kürzesten reziproken Gittervektor $\vec{G}_{hkl}$. Leiten Sie mit Hilfe der genannten Informationen die Bragg-Bedingung

$$n\lambda = 2d\sin(\theta) \tag{3}$$

her. Dabei bezeichnet λ die Wellenlänge der Röntgenstrahlung, d den Abstand zwischen zwei Gitterebenen, θ den Winkel zwischen Röntgenstrahl und Gitterebene und n die Beugungsordnung.

Hinweis: Der Zusammenhang

$$\sin^2(\theta) = \frac{1}{2}\big(1 - \cos(2\theta)\big)$$

wird nützlich sein.

Aufgabe 4: Fourieranalyse und Fouriertransformation — 7 Punkte

a) Eine periodische und stückweise stetige Funktion $f(t)$ lässt sich als Fourierreihe

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} \Big(a_k \cos(kt) + b_k \sin(kt) \Big) \tag{4}$$

mit den Fourierkoeffizienten

$$a_0 = \frac{2}{T} \int_0^T f(t) \mathrm{d}t \tag{5}$$

$$a_k = \frac{2}{T} \int_0^T f(t) \cos(kt) \mathrm{d}t \tag{6}$$

$$b_k = \frac{2}{T} \int_0^T f(t) \sin(kt) \mathrm{d}t \tag{7}$$

darstellen. T ist die Periode von $f(t)$. Gegeben sei nun die 2π-periodische Funktion $f_1(t)$

$$f_1(t) = \cos(t)$$

und die Funktion $f_2(t)$

$$f_2(t) = \begin{cases} 0, & t = 0,\ t = \pi,\ t = 2\pi \\ A, & 0 < t < \pi \\ -A, & \pi < t < 2\pi \end{cases} .$$

Berechnen Sie die Fourierkoeffizienten von $f_1(t)$ und der 2π-periodischen Fortsetzung von $f_2(t)$!

Hinweis: Die Fourierkoeffizienten für $f_1(t)$ müssen nicht zwingend über die Definitionen (Gleichungen (5) bis (7)) berechnet werden. Sie lassen sich auch ohne explizite Rechnung bestimmen. Wenn Sie die Fourierkoeffizienten jedoch explizit über die Definitionen berechnen, wird der Zusammenhang

$$cos(x) \cos(y) = \frac{1}{2} \big(\cos(x-y) + \cos(x+y) \big)$$

und eine Fallunterscheidung für verschiedene k-Werte hilfreich sein.

b) Die Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ sei absolut integrierbar. Dann ist die Fouriertransformierte

$$\hat{f} : \mathbb{R} \to \mathbb{C}, \quad \hat{f}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \mathrm{e}^{-i\omega t} \mathrm{d}t \tag{8}$$

für alle $\omega \in \mathbb{R}$ definiert. Bestimmen Sie die Fouriertransformierte der Funktion $f_3(t) = \mathrm{e}^{-a|t|}$, wobei a eine reelle und positive Zahl ist.